

КВАНТО-МЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ Ca_2CoWO_6 В РАМКАХ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Зафари Умар^{1*}, Курбониён М. С².

¹)Таджикский национальный университет, Душанбе, Таджикистан

²)Центр инновационного развития науки и новых технологий АН РТ,
Душанбе, Таджикистан

*E-mail: zafari_umar@mail.ru

QUANTO-MECHANICAL CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE OF Ca_2CoWO_6 WITHIN THE FUNCTIONAL DENSITY THEORY

Zafari Umar^{1*}, Qurboniyon M. S².

¹) Tajik National University, Dushanbe, Tajikistan

²)Center of innovation development of science and new technologies of the AS of the RT,
Dushanbe, Tajikistan

In the present article are rearranged results of quantum - mechanical calculations of the electronic structure of half-metallic material Ca_2CoWO_6 , with use two various schemes of calculation - GGA and GGA+U. Calculations of electronic structure were carried out by the full-potential (linearized) augmented plane-wave ((L)APW) + local orbital's (lo) method by means of the WIEN2k software package.

В настоящей работе представлены результаты кванто - механических расчетов электронного строения полуметаллического материала Ca_2CoWO_6 , с использованием двух различных схем расчета - GGA и GGA+U. Расчеты электронной структуры проводились модифицированным методом (линеаризованных) присоединенных плоских волн (L)APW+lo с помощью программного пакета WIEN2k [1].

В наших расчетах используется моноклинная кристаллическая структура Ca_2CoWO_6 с пространственной группой $14_P21/c$. Результаты кванто – механических расчетов электронного строения Ca_2CoWO_6 , которые получены с учетом спин поляризации показывает, что это система имеет полуметаллическую природу в рамках GGA расчеты. При этом запрещенная щель спин – вверх электронной плотность изоляторное состояние составляет 1.49 eV. Две основные энергетические пики в спин – вниз электронной состояний образовано зачет $3d$ электронов атома Co и проходит через уровни Ферми. Плотность $2p$ электронов атома кислорода лежит в энергетических областях -7.16 eV и -0.33 eV. Плотность $5d$ электронов атома W в спин – вверх электронной состояний лежит в областях 1.49 eV – 2.41 eV, а в спин - вниз электронные состояния лежит в областях -0.89 eV до 2.77 eV.

В рамках GGA+U приближения, для сильно коррелированных $3d$ электронов атома Co расчеты проводится со следующими значениями параметра U: U=1eV, U=2 eV, U=3eV, U=4 eV и U=5eV и для слабо коррелированных $5d$ электронов атома W параметра U имеет только одно значение -1eV. Анализ полученных

результатов показывает, что в электронной структуре системы Ca_2CoWO_6 начиная от $U=1\text{eV}$ в спин - вниз плотность электронное состояние появляется запрещенная щель со значением 0.67 eV . Значения запрещенная щель для спин - вверх и спин - вниз электронного состояния при $U=5\text{ eV}$ имеет 2.77eV и 2.45 eV соответственно. Значение запрещенная щель для спин - вверх и спин - вниз электронное состояние при всех значениях параметра U приведено в таблице 1.

Таблица 1. Ширина запрещенной щели для спин - вверх и спин - вниз электронное состояние при всех значениях параметра U .

E	Ca_2CoWO_6 GGA ($U=0$)	Ca_2CoWO_6 GGA+U ($U=1\text{eV}$)	Ca_2CoWO_6 GGA+U ($U=2\text{eV}$)	Ca_2CoWO_6 GGA+U ($U=3\text{eV}$)	Ca_2CoWO_6 GGA+U ($U=4\text{eV}$)	Ca_2CoWO_6 GGA+U ($U=5\text{eV}$)
E_{gup}	1.49146	1.79296	2.05868	2.32671	2.57012	2.77951
E_{gdn}	Metal	0.67729	1.26955	1.75527	2.13473	2.45297

1. Blaha P and all. WIEN2k, an augmented plane wave + local orbital's program for calculating crystal properties. Techn. University at Wien, Austria, 3-9501031-1-2 (2001).
2. Alo Dutta. Magnetic structure of double perovskites Ca_2MWO_6 ($\text{M}=\text{Co}, \text{Ni}$): A first principles study. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 322 (2010).